



应用通讯案例 # CA 281753

## 基于化合物筛查技术 (CBS)：在 GC-MS/MS 上轻松设置多残留MRM分析的新型改良方法

### 摘要

本文介绍了一种采用基于化合物筛选技术 (CBS) 在 Scion TQ 三重四极杆质谱仪上设置多残留MRM分析的新方法。

### 简介

三重四极杆质谱仪多反应监测 (MRM) 模式已经被越来越多地用于在单次运行中筛选数以百计的目标残留物。由于每确认一种残留物一般需要两到三个 MRM，而一个 MRM 方法又可能含有数百甚至上千个 MRM，因此仪器设置和数据处理的成为方法开发中一项极其复杂和繁琐的工作。

此外，因为单独一个色谱运行中会有很多重叠的 MRM，每个 MRM 的扫描时间 (驻留时间) 都需要非常仔细的优化，否则会因为扫描时间过短而损失灵敏度，同时如果每个峰的扫描数据点不充分，也会造成峰形失真变形，最终导致灵敏度和精确度都分别受到影响。

为了克服这些问题，过去会将色谱运行分成许多个片段，而只有每个片段中洗脱的组分的 MRM 在片段内得到监控。但是，对于那些在两个相邻片段的接合处附近洗脱的残留物，如果这些残留物的洗脱时间从一个片段移动到另一个片段，通常需要同时在两个片段中分别设置它们的 MRM，才能“捕捉”到它们。因此，在方法中加入了更多重复的 MRM，从而再次导致更慢的扫描周期。

Scion TQ 所使用的新版 Bruker MS Workstation，采用基于化合物筛选技术 (CBS)，极大地简化了多残留物分析的方法开发。在这种方法中，MRM 按照目标化合物被分组，采集方法和数据处理之间会形成动态链接。

数据系统标配的数据库，其中包含包括农药在内的 900 种最常见污染物的 2500 多个 MRM，可以直接从 MRM 数据库中选择化合物和其对应的 MRM，然后轻松添加到方法编辑器中。

最初运行数次确定每种化合物的保留时间窗口后, 就可依据平均峰宽计算最佳扫描时间, 并在考虑所有重叠的保留时间窗口之后软件会进行相应的分配。因此扫描周期得到优化, 也不再需要使用分段扫描。图 1 显示了 CBS 的工作原理。

CBS 的主要优点在于, 新工作流程设计参照化学工作者的思维方式, 并非关注于每个单独的 MRM, 而是关注于化合物。数据库中的每个条目都是一个与保留时间、主要和次要 MRM 离子对其碰撞能量相链接的化合物。因此, 通过从数据库将化合物导入到方法编辑器中, 软件将生成采集方法的MRM 表格, 并且可与数据处理同步。

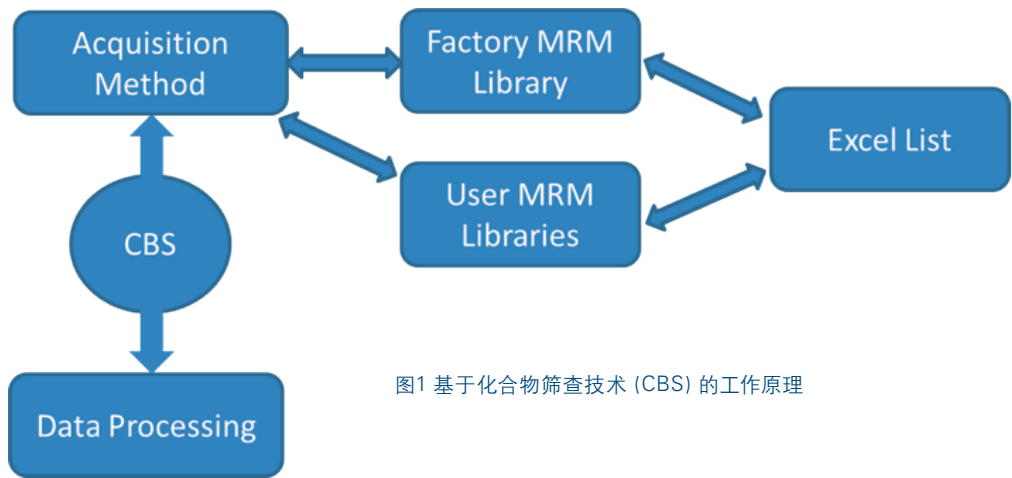


图1 基于化合物筛查技术 (CBS) 的工作原理

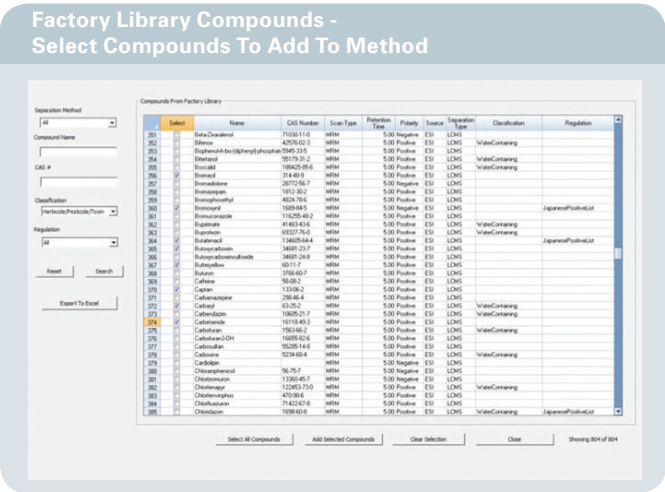


图2 从标配的MRM数据库中将目标农药导入到采集方法

## 示例

图1概括了Scion TQ 运用CBS技术 开发MRM 的方法分析 258 种农药 (516 个 MRM) 的五大步骤:

步骤 1. 从标配的MRM 数据 (图 2) 或在用户自建的数据库中将目标农药导入到Acquisition Method (采集方法) 中 (图 3)。

步骤 2. 找到并调整每种农药的保留时间窗口。这可能需要使用不同的升温程序进行数次测试, 如果是较多的农药, 需要将它们分成较小的组, 以便每次能分析一个组。在目前的方法中, 是以五个农药标准溶液进行测试的, 每个标准溶液中包含 50-60 种农药。最终的方法是含有了五个组所有农药 MRM 的结果。图 4 中显示最终方法中所有 258 种农药的保留时间窗口。

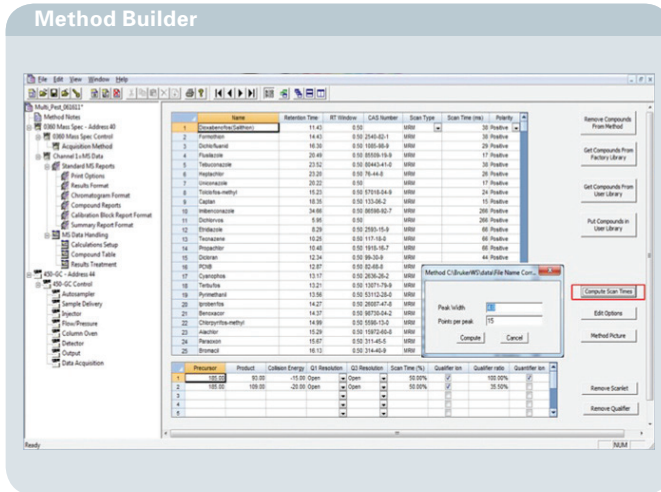


图3 从MRM数据库导入数据后的数据采集结果, 以及根据峰宽和谱图数据点计算扫描次数

步骤 3. 如图 3 所示, 单击 Compute Scan Times (计算扫描时间), MS Workstation 可根据平均峰宽输入值以及所需的每个峰的扫描数据点数 (15) 自动计算和分配每个 MRM 的扫描时间。因此每种农药获得 266 ms (即每 MRM 为 133 ms) 至 15 ms (每 MRM 为 7.5 ms) 的扫描时间。

步骤 4. 完成样品分析后, 单击 MS Data Handling (MS 数据处理) 的 Compound Table (化合物表格) 部分中的 Build Compound List (构建化合物列表) 按钮, 可将 Acquisition Method (采集方法) 的化合物 MRM 信息自动填入 Compound Table (化合物表格) (图 5)。

步骤 5. 使用 MS Workstation 直观易用的功能处理和查看采集的数据 (图 6)。仅需轻点几下鼠标, 就可将从当前实验中得出的更新保留时间或离子比例上传到采集方法中, 以用更新后的方法运行下个批次的样本。

如图 1 中所示,除了标配的 MRM 数据库(只读)外,CBS还有其它两个重要功能:允许用户自行创建 MRM 数据库;能将MRM 数据库与 .csv 文件互相导入导出,从而可使用如 Microsoft® Excel® 之类的电子制表程序编辑。这就为使用者提供更多灵活性和方便性,从而提高工作效率。

## 总结

使用基于化合物筛选技术 (CBS), 在 Scion TQ 上进行方法开发变得如此简单、快速和灵活。该软件可以为每个 MRM 计算和设置最佳扫描时间, 从而确保 Scion TQ 良好的灵敏度和分析精确度。

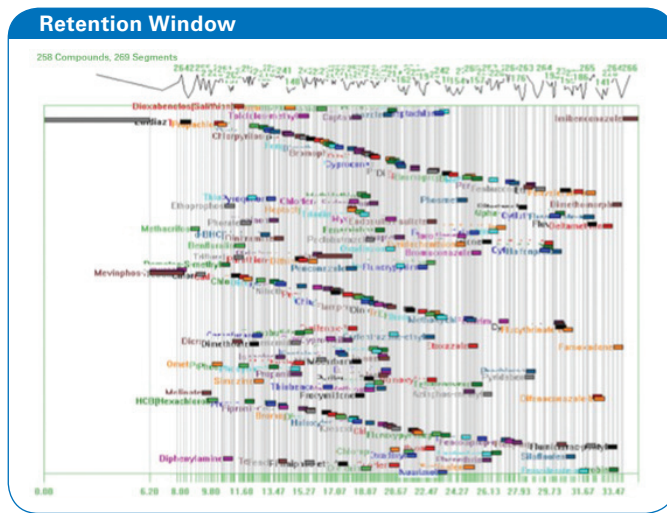


图 4. 显示多个重叠的 258 种农药的保留时间窗口

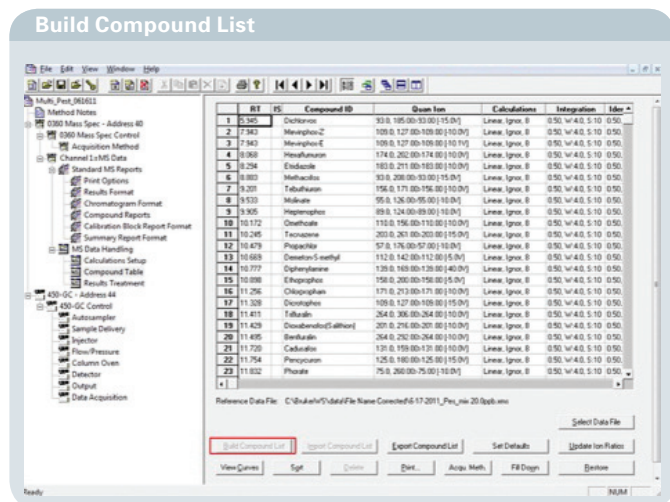


图5 单击Build Compound List (构建化合物列表) 后, 根据数据采集信息自动计算生成的化合物表格

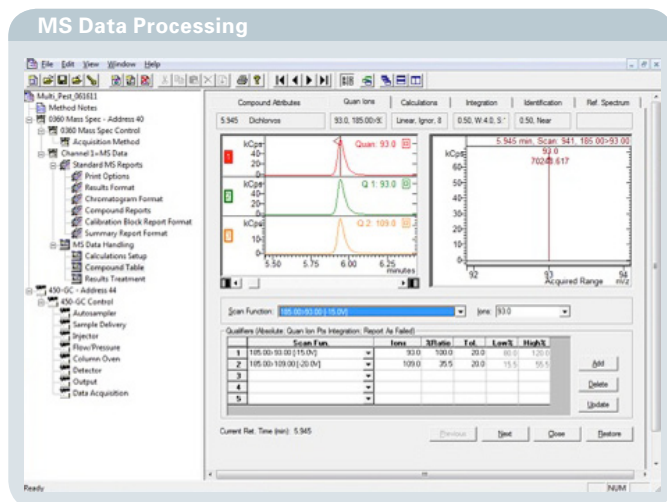


图6 MS workstation直观易用的数据处理

#### 作者:

Kefei Wang, Zicheng  
Yang, Muntean Felician,  
Qingyu (Helen) Sun

#### 致谢

感谢 Bruker CAM Fremont  
全体软件开发人员将 CBS  
概念变为现实。

<b>仪器与软件</b>
三重四极杆质谱仪

<b>关键词</b>
MRM
扫描时间
多残留物分析

For research use only. Not for use in diagnostic procedures.

Bruker Daltonics is continually improving its products and reserves the right  
to change specifications without notice. © Bruker Daltonics 06-2011, #281753

#### ● Bruker Daltonik GmbH

Bremen · Germany  
Phone +49 (0)421-2205-0  
Fax +49 (0)421-2205-103  
sales@bdal.de

[www.bruker.com/ms](http://www.bruker.com/ms)

#### Bruker Daltonics Inc.

Billerica, MA · USA  
Phone +1 (978) 663-3660  
Fax +1 (978) 667-5993  
ms-sales@bdal.com

Fremont, CA · USA  
Phone +1 (510) 683-4300  
Fax +1 (510) 490-6586  
ms-sales@bdal.com